

Aufgabenblatt 13

13.1 openMP und Projektionsmethode (Hausaufgabe + Email an die Tutoren, Einsendeschluss Mitternacht vor der Übung)

Untersuchen Sie die beiden Matrizen aus Aufgabe 12.2 mit der Projektionsmethode. Verwenden Sie dabei `openMP`.

1. Schreiben Sie ein Programm, das die zu untersuchende Matrix (H_{ij}) einliest und die folgenden Iterationsschritte ausführt.

Nullter Schritt: Erzeugung eines normierten (zufälligen) Zustandes ϕ_0 mit den Komponenten ϕ_0^j .

Erster Schritt: Erzeugung des unnormierten neuen Zustandes

$$\tilde{\phi}_1^i = \sum_j (\delta_{ij} - \epsilon H_{ij}) \phi_0^j \quad (1)$$

mit einem kleinen ϵ , z.B. $\epsilon = 0.01$.

Zweiter Schritt: Normierung des neuen Zustandes

$$\phi_1^i = \tilde{\phi}_1^i / \sqrt{\sum_j |\tilde{\phi}_1^j|^2}. \quad (2)$$

Dritter Schritt: Berechnung des Energieerwartungswertes zu Kontrollzwecken

$$E_1 = \sum_{i,j} \phi_1^i H_{ij} \phi_1^j. \quad (3)$$

Danach wird mit dem ersten Schritt fortgefahren und der nächste Zustand erzeugt usw..

2. Alle drei Schritte können mittels `openMP` parallelisiert werden. Testen Sie mal, was das bringt. Eine perfekte Skalierung würde man erhalten, wenn die Rechenzeit antiproportional zur Zahl der verwendeten Threads wäre.
3. Tragen Sie den Energieerwartungswert gegen die Zahl der Schritte auf. Untersuchen Sie unterschiedliche ϵ . Erreichen Sie den aus Aufgabe 12.2 bekannten Grundzustand?

Anmerkung: Oft speichert man die Matrix nicht als Matrix, sondern nur die von Null verschiedenen Elemente und ihre Indizes. Dann funktioniert die Parallelisierung nicht so gut, aber man braucht deutlich weniger Speicherplatz.

13.2 Fourier-Transformation (Hausaufgabe + Bearbeiten in den Übungen)

Für Freunde der Experimentalphysik: Ein Experimentalphysiker hat in seinem Experiment die in der Datei `experiment.dat` gespeicherten experimentellen Messdaten $b(t)$ experimentell bestimmt. Sein experimenteller Messapparat hat dabei das experimentelle Ergebnis etwas verrauscht. Der auch theoretisch nicht ganz unversierte Experimentator weiß aber, dass sein wahres experimentelles Messergebnis $f(t)$ aus einer Überlagerung dreier harmonischer Schwingungen besteht, d.h.

$$f(t) = \sum_{i=1}^3 \sin(2\pi f_i t) . \quad (4)$$

f_1 , f_2 und f_3 sind die unbekanntenen Frequenzen.

Rekonstruieren Sie die wahren experimentellen Werte $a(t)$, indem Sie die experimentellen Messdaten $b(t)$ fouriertransformieren und die vorkommenden Frequenzen filtern (Mathematica oder C-/F-Programm). Erläutern Sie Ihr Vorgehen und stellen Sie die experimentellen Messdaten $b(t)$ sowie die rekonstruierten wahren experimentellen Werte $a(t)$ graphisch dar. Diskutieren Sie insbesondere die Filterprozedur und vergleichen Sie auch mit dem Ausgangssignal $f(t)$.

Diskutieren Sie, ob die Filterprozedur die „wahren“ Messdaten beeinflusst.

In dieser Teilaufgabe kam der Term „Experiment“ 14-mal vor. Das gleicht das sonstige Übergewicht der theoretischen Physik in dieser Veranstaltung mehr als aus!